

УДК 543.422.8, 681.3.06

ТЕХНОЛОГИЯ ПОСТРОЕНИЯ ИНТЕЛЛЕКТНОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ АВТОМАТИЗАЦИИ ПЛАНИРОВАНИЯ МЕТОДИКИ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА

Е.А.Черкашин, Т.Ю.Черкашина, Е.В.Худогова**
Институт динамики систем и теории управления СО РАН
664033, Иркутск, Лермонтова, 134
*Институт земной коры СО РАН
664033, Иркутск, Лермонтова, 128

Поступила в редакцию 5 сентября 2002 г.

Рассматривается подход к проектированию аналитического программного обеспечения, ориентированного на автоматизацию *трудноформализуемых* приемов аналитических исследований. Это может быть подбор стандартных образцов для калибровки, выбор и/или построение/уточнение калибровочного уравнения. Рассматривается подход к автоматизации планирования методики анализа, направленной на решение конкретной аналитической задачи. Программное обеспечение строится с использованием современных методов науки информатики (Computer Science), методов искусственного интеллекта. В качестве приложения выбран рентгенофлуоресцентный анализ.

Черкашин Евгений Александрович – кандидат технических наук, старший научный сотрудник Института динамики систем и теории управления СО РАН.

Область научных интересов: разработка новых методов интеллектуализации программного обеспечения и их приложений в технических системах.

Автор более 25 печатных работ.

Черкашина Татьяна Юрьевна – ведущий инженер Аналитического центра Института земной коры СО РАН.

Область научных интересов – рентгенофлуоресцентный анализ горных пород.
Автор 15 печатных работ.

Худогова Елена Владимировна – инженер Аналитического центра Института земной коры СО РАН.

Область научных интересов: рентгенофлуоресцентный анализ горных пород.
Автор 11 печатных работ.

К настоящему времени накоплен большой опыт применения рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) при исследовании качественного и количественного состава вещества. Этот опыт выражается в разнообразных методиках определения элементов от В до U [1-10] в различных природных материалах. Аналитик строит последовательность приемов в процессе решения конкретной аналитической задачи. при этом он, как правило, пользуется разнообразными методиками, адаптированными на определенные задачи, источниками дополнительной информации, например подсказками более опытных коллег, интуицией и собственным опытом. В данной работе описывается программная технология автома-

тизации планирования методики анализа в РФА современными методами науки информатики (Computer Science), а именно методами искусственного интеллекта.

Аналитические приемы, с точки зрения формализуемости, мы условно разделяем на две категории: *формализуемые* и *трудноформализуемые* (в т.ч. *частично формализуемые* и т.п.). В категорию формализуемых попадают приемы, для которых существует описание конкретной последовательности действий на некотором формальном языке (например, на алгоритмическом языке программирования). Категорию трудноформализуемых приемов составляют приемы, для которых такое строгое описание получить

сложно, к таким приемам относятся различные рекомендации, творческие приемы и т.п. Пример формализуемого приема - расчет калибровочных коэффициентов по известному набору стандартных образцов (СО) методом регрессионного анализа при известных измеренных значениях аналитических сигналов и параметров калибровочного уравнения. В качестве трудноформализуемых приемов выступают выбор СО на основе известной *a priori* информации об исследуемом объекте, выбор условий съемки, выбор и уточнение калибровочного уравнения (модели), выбраковка данных по СО для расчета калибровочных коэффициентов по выбранной модели и набору СО. Последовательность приемов формирует *способ анализа* [11].

Применение способа анализа к конкретной аналитической задаче, или классу задач, задает *методику анализа* [11]. Построение методики анализа аналитиком производится с учетом постановки задачи, имеющегося набора СО, требований к качеству результатов анализа, свойств известных калибровочных уравнений, особенностей имеющегося аналитического прибора и т.д. Рассматриваемая нами *задача автоматизации планирования методики* РФА – это разработка программного обеспечения, которое составляет (проектирует) последовательность формализуемых и трудноформализуемых приемов анализа для решения конкретной аналитической задачи в *автоматическом режиме* т.е. при незначительном участии аналитика или вовсе без его участия.

Одним из важных достижений автоматизации формализуемых приемов [12–14] является то, что аналитику теперь можно концентрироваться на более качественном использовании остальных приемов с целью дальнейшего улучшения качественных и количественных характеристик решения аналитической задачи. Примерами автоматизации формализуемых приемов являются нижеследующие работы. Е.В.Молчановой и др. [12] разработан программный продукт, позволяющий пользователю при помощи системы меню, используя ряд формализуемых приемов, проектировать методику, рассчитанную на определенный класс исследуемых образцов. Ю.Б.Плужковым и др. [13] предложен оригинальный метод вычисления концентраций элементов в образцах путем построения локальной градуировочной выборки для каждой анализируемой пробы в отдельности. В работе Б.И.Китова и др. [14] предложена программная система автоматизации обработки данных исследования в РФА, в т.ч., при

помощи экранных форм пользователем производится выбраковка данных СО, настройка калибровочного уравнения, вычисление концентраций определяемых элементов, ведется база данных проведенных исследований. В последней работе сделан шаг в направлении автоматизации трудноформализуемых приемов РФА (отбраковка данных по СО и уточнение калибровочного уравнения), *требующих, однако, непосредственного участия аналитика.*

Современные зарубежные программно-аппаратные системы полуколичественного и количественного анализа вещества в основном базируются на следующих предположениях. Аналитический прибор – это стабильное устройство, параметры которого меняются незначительно на протяжении всего времени его использования. Это справедливо для современных приборов ведущих фирм-производителей (ARL, Philips, Bruckner и т.д.), но, как правило, не справедливо для отечественных (а также устаревших) приборов. В случае «ухода» характеристик (второе предположение) производится калибровка прибора некоторым заранее заданным для ряда определенных аналитических задач набором СО. Этого, вероятно, достаточно для осуществления анализа на производстве с фиксированными аналитическими задачами. В обоих случаях, если произведен ввод нового способа анализа или появилась новая задача, что является обычным делом в научно-исследовательских учреждениях, необходима, в общем случае, выработка новых рекомендаций, в частности, для калибровки прибора.

Поставленная нами проблема лежит несколько в иной области и преследует цель не только объединить существующие формализуемые приемы в рамках одного открытого программного комплекса, но и создать как «электронные» аналоги трудноформализуемых приемов анализа, так и разработать программные технологии автоматизации построения методики анализа для конкретной аналитической задачи. Данная технология позволит, в частности, *автоматически адаптировать* известные способы и приемы анализа к новым задачам. В основе предлагаемой технологии лежат известные в науке информатике методы автоматизации интеллектуальной деятельности человека, называемые *искусственным интеллектом* (ИИ) [15]. Рассмотрим возможности, которые предоставляет ИИ для решения поставленной проблемы автоматизации.

Задачи и методы искусственного интеллекта, их свойства

В области ИИ изучаются и разрабатываются

методы автоматизации с помощью ЭВМ решения задач, в которых присутствуют *принятие решения и/или обработка символьной информации*. К задачам принятия решения относятся распознавание образов, экспертное оценивание и консультация, планирование действий, понимание естественного языка, качественный анализ данных. Обработка символьной информации – задачи автоматического доказательства логических теорем, преобразование сложных структур данных, естественно-языковые человеко-машинные интерфейсы и т.п. По определению к задачам, решаемым на ЭВМ методами ИИ, относятся задачи, при решении которых человеку требуется использование своих интеллектуальных способностей (например, логических рассуждений).

Среди полезных свойств методов ИИ [15, 16] для автоматизации РФА выделяются *решение задачи в терминах «возможностей» и учет всей доступной информации*. Первое свойство представляет аппарат автоматизации планирования вычислительной процедуры как комбинации различных «возможностей», где каждая «возможность» решает одну небольшую задачу. Для каждой «возможности» известна информация о задаче, которую она решает, например свойства результата, качество входных данных. Как правило, в таких системах существует несколько «возможностей» для решения одной задачи, т.е. решается проблема выбора «возможности», наиболее соответствующей решаемой подзадаче.

В отличие от применения аппарата математического анализа, или математического моделирования, ИИ позволяет использовать в программе всю доступную информацию о решаемой задаче и входных данных. Пример такой информации в РФА – какая-либо рекомендация по применению конкретного калибровочного уравнения («возможности»), в зависимости от условий съемки и качественных характеристик промежуточных данных эксперимента. В процессе функционирования системы ИИ используют *формализованные знания* – общие высказывания об отношениях объектов и классов объектов предметной области решаемой задачи. В виде знаний, в частности, формализуются трудноформализуемые приемы. Выделяется особый класс систем ИИ, а именно систем, основанных на знаниях (СОЗ) [15]. Далее будет приведен пример формализации приема выбора набора СО «по классификации» в СОЗ CLIPS.

Автоматизация на ЭВМ неформальных приемов методами ИИ позволит продвинуться в решении ряда важных задач РФА:

- формализация трудноформализуемых приемов в различных дескриптивных (описательных) языках;

- автоматический контроль состояния прибора и действий аналитика. Происходит дополнительная подстраховка аналитика от неправильных действий и необдуманных решений, экономится ресурс аналитического прибора. Создается возможность одновременного и частого контроля большого числа различных параметров;

- разработка обучающих программных систем – актуальная задача подготовки новых квалифицированных кадров (в частности, экономия времени ведущих специалистов);

- повышение производительности труда аналитика.

Таким образом, задача автоматизации трудноформализуемых приемов – актуальная задача в области РФА.

Среди известных авторам работ за рубежом по сходной тематике выделяется одна из первых в мире экспертных систем (ЭС) DENDRAL [17] для анализа первичных данных спектроскопии (инфракрасной, ядерного магнитного резонанса и масс-спектрометрии) и определения химической структуры вещества. Основное отличие разрабатываемого проекта от ЭС DENDRAL заключается в том, что рассматриваемая проблема автоматизации включает в себя построение программной технологии планирования методики анализа (способа анализа для решения конкретной задачи элементного анализа вещества).

Архитектура программного комплекса автоматического планирования методики анализа вещества в РФА

На рисунке изображена архитектура программного комплекса планирования методики анализа вещества в РФА, а также ее место во взаимодействии с «внешним миром».

Программный комплекс построен по модульному принципу и включает в себя модуль *Машины вывода*, функционирующего на основе автоматического доказательства теорем (АДТ) [18], и модуль *Управление программной системой*, обеспечивающий взаимосвязь между программными модулями и «внешним миром». В программном комплексе реализовано хранение разнородной информации. База данных содержит информацию общего характера, а именно: характеристики прибора, определяемые элементы, предел обнаружения, аттестованные концентрации определяемых элементов в СО. Программные модули включают в себя формализуемые приемы анализа. В Базе знаний в формализованном виде хра-

няются информация о трудноформализуемых приемах, а также описания всех формализуемых и трудноформализуемых приемов, известных программному комплексу.



Архитектура и схема взаимодействия модулей интеллектуального программного комплекса автоматизации планирования методики анализа вещества в РФА

Программная система получает информацию об аналитическом сигнале с *Рентгеновского спектрометра* через *Интерфейс к прибору*, а также другую информацию путем опроса *Аналитика* (в процессе диалога). Информация поступает в *Модуль управления*. Одна ее часть используется непосредственно в *Модуле управления*, а другая передается в *Машину вывода*, где формирует основу принимаемых логических заключений. Получаемые логические заключения представляют собой, кроме прочего, планы решения задач или подзадач, состоящих из комбинации известных системе приемов. Таким образом, в данной схеме *Аналитик* выполняет функции источника информации об исследуемом объекте.

Программное обеспечение представляет собой объединение современных информационных технологий:

- разработка ведется в объектно-ориентированной распределенной многопользовательской среде разработки Интернет-приложений Zope¹. Это, в частности, позволяет управлять прибором с любой рабочей станции, подключенной к сети Интернет;
- программа имеет встроенный язык программирования, реализованный на базе языка программирования общего назначения Python². С помощью этого языка обеспечивается возможность программирования новых формализуемых приемов;
- для представления табличных данных ис-

пользуется SQL-Сервер MySQL³;

- представление слабоструктурированной информации осуществляется в языке XML⁴;
- разрабатываемая система является открытой. Разработчик имеет доступ ко всему исходному коду системы;
- интерфейс пользователя строится с применением современной Flash⁵-технологии, позволяющей в высококачественной векторной графике отображать любую информацию, представлять процесс съемки в естественном для аналитика виде;
- механизм автоматизации рассуждений построен на основе модуля КВАНТ/1 [18] или системы управления базами знаний CLIPS.

Используемый подход практически не имеет видимых ограничений в дальнейшем развитии и совершенствовании. Возможна интеграция с другими Интернет- и геоинформационными системами и т.п.

Автоматизация планирования методики анализа вещества в РФА

В разрабатываемых технологии и программном обеспечении, в соответствии с принятой терминологией из [11], предполагается, что методика анализа может включать в себя, кроме прочих, следующие основные приемы РФА:

- выбор СО;
- выбор условий съемки;
- регистрация импульсов аналитических линий;
- учет взаимных влияний элементов;
- выбраковка данных по образцам для построения калибровочного уравнения;
- выбор калибровочного уравнения и его уточнение на конкретную задачу;
- расчет калибровочных коэффициентов по выбранному уравнению, полученным интенсивностям аналитических линий, набору СО и т.д.;
- оценка метрологических характеристик результатов анализа и другой качественный анализ результата.

Аналитический способ [11] строится в соответствии с некоторым сценарием, абстрагированной последовательностью приемов. В начале этой последовательности задается набор входных данных и его характеристики, а на выходе установлены требуемые качественные характеристики результата. Выбор конкретного приема для каждого шага сценария, задание входных и вы-

¹ <http://www.zope.org/>

² <http://www.python.org/>

³ <http://www.mysql.org/>

⁴ <http://www.w3c.org/XML/>

⁵ <http://www.macromedia.com/software/flash/>

ходных данных этого приема (выходные данные одного приема передаются на вход одного из последующих приемов), таких, что построенная последовательность преобразует данные на входе в результат на выходе, удовлетворяющий заданным требованиям, и есть искомая методика анализа.

Рассмотрим один из возможных сценариев для задач количественного определения химического состава вещества горных пород. Будем считать, что на входе подается набор проб для анализа, определен набор элементов, концентрации которых требуется определить, а также, возможно, другая дополнительная информация (например, для некоторых проб могут быть известны примерные концентрации некоторых элементов или тип породы). На выходе имеется набор концентраций определяемых элементов для каждой пробы набора.

Предлагается следующий сценарий:

1. Проверить соответствие постановки задачи возможностям имеющегося аналитического прибора:

1.1. позволяет ли прибор измерять интенсивности аналитических линий определяемых элементов;

1.2. каков предел обнаружения по каждому определяемому элементу;

1.3. допустимы ли предполагаемые условия съемки.

2. Получить информацию о примерном содержании порообразующих элементов в исследуемых пробах. Это можно сделать несколькими способами, в зависимости от имеющейся информации:

2.1. если определены концентрации некоторых элементов в пробах, и среди них есть требуемые элементы, то использовать эти значения в качестве примерных содержаний;

2.2. примерные содержания могут быть определены по типу/названию горных пород (из базы данных);

2.3. предположить, что пробы соответствуют среднему содержанию SiO_2 ;

2.4. провести полуколичественный анализ нескольких проб, используя СО со средним содержанием SiO_2 .

3. На основе полученной на предыдущем шаге информации выбрать и установить оптимальные режимы функционирования прибора для дальнейшей съемки.

4. Измерить интенсивности аналитических линий образца сравнения (ОС). В качестве ОС может выступать (в зависимости от ситуации):

4.1. СО, который при выбранных условиях

съемки дает хорошую воспроизводимость измерения интенсивностей аналитических линий определяемых элементов;

4.2. СО с концентрациями определяемых элементов выше, чем в калибровочном наборе проб.

5. Измерить интенсивности аналитических линий каждой пробы. В процессе измерения целесообразно:

5.1. периодически возвращаться к съемке ОС;

5.2. в соответствии с полученной информацией, анализировать состояние прибора и корректировать условия съемки (например, выбирать фильтры на каналы прибора, время экспозиции).

6. Выбрать калибровочное уравнение в зависимости от требований к качеству получаемых результатов:

6.1. если требуется только грубая оценка концентраций, то можно использовать уравнение пропорции;

6.2. если требуется более высокая точность анализа, то выбираются уравнения, включающие составляющие с взаимным наложением аналитических линий элементов и квадратичные члены;

6.3. возможно также использование других приемов выбора калибровочного уравнения (например, при высоких требованиях к точности определения концентрации элементов допустимо использовать способ фундаментальных параметров и т.п.).

7. По данным грубой оценки выбрать СО для построения калибровочного уравнения.

7.1. целесообразно разделить пробы на классы в зависимости от концентрации порообразующих элементов;

7.2. Для каждого класса одним из нижеперечисленных приемов или их комбинацией:

а) отнести образец по содержанию порообразующих элементов к одному из известных классов, а затем выбрать все СО из этого класса (правило «по классификации»);

б) по примерной оценке концентрации порообразующих элементов определить некоторый интервал концентраций, и выбрать все СО из этого интервала (правило «по интервалу»);

с) используя знания о взаимном наложении аналитических линий элементов, выбрать СО так, чтобы учесть наложения с максимальной точностью;

д) при недостаточном количестве случайных величин (СО) (количество случайных величин должно быть меньше количества СО), в зависимости от того, какое количество независимых компонент содержит калибровочное уравнение,

остальные СО выбираются каким-либо дополнительным известным программным приемом.

8. Измерить интенсивности аналитических линий СО подобно рассмотренному в п.5.

9. Уточнить калибровочное уравнение. Уточнение выполняется на основе:

9.1. данных о взаимных влияниях элементов;

9.2. качественного анализа коэффициентов корреляции между аттестованными и измеренными значениями концентраций определяемых элементов в СО.

10. Выполнить выбраковку данных по СО, например:

10.1. по оценке концентрации определяемого элемента;

10.2. отбраковать предельные случаи (значения концентраций определяемого элемента, имеющие определенный порядок величины);

10.3. использовать информацию о взаимном влиянии элементов.

11. Вычислить калибровочные коэффициенты, например, методом наименьших квадратов.

12. Вычислить значения концентраций определяемых элементов в исследуемых пробах по имеющимся данным.

13. Качественный анализ результатов исследования. Здесь возможно повторное уточнение результата анализа, начиная с п.6.

Система реализуется как СОЗ, где в базе знаний содержатся сценарии, качество входных и выходных параметров, трудноформализуемые приемы, их описания и т.п. Ввиду сложности и малой изученности предметной области (области автоматизации планирования методики анализа), а также для оценки производительности разрабатываемой программной системы реализован пилотный проект – программная система “Количественное определение содержания порообразующих и следовых элементов в образце неизвестного состава”.

Пилотный проект. Результаты тестов

Программная система разработана для рентгеновского спектрометра СРМ-25, укомплектованного персональным IBM-совместимым компьютером на базе процессора Intel Celeron 500. Система работает под управлением операционной системы ALT-Linux Master⁶ 2.0. Языком программирования является объектно-ориентированный язык Python версии 2.2.1. Механизм логического вывода построен на базе продукционной системы CLIPS.

В системе реализованы базовые функции про-

граммного комплекса: интерфейс к прибору, интерфейс к продукционной системе CLIPS, модули вычисления калибровочных коэффициентов и вычисления концентраций. База данных содержит информацию о двадцати пяти СО, их классификацию, данные о взаимном влиянии элементов и характеристики СРМ-25. В базу знаний введено шесть правил, реализующих несколько неформальных аналитических приемов: выбор СО «по классификации» исследуемой пробы, выбор СО «по интервалу», распределение СО по слотам СРМ-25, уточнения задачи (например, в задачу вводится подцель – измерение аналитических сигналов элементов, влияющих на аналитический сигнал определяемых элементов).

По сравнению с рассмотренным выше сценарием последовательность приемов задана жестко, решается задача выбора параметров некоторых приемов, в частности подбора СО по грубой оценке порообразующих элементов.

В качестве образца с «неизвестным» содержанием выбран СО ультраосновного состава DTS-1. Однако в данном эксперименте предполагается отсутствие какой-либо информации об этой пробе. Для начальной оценки концентраций исследуемых элементов выбран СО среднего состава СГД-2. Использовалась формула-пропорция

$$C_{пробы}^i = (C_{СО}^i \cdot I_{пробы}^i) / I_{СО}^i,$$

где i – индекс определяемого элемента; $C_{пробы}^i$ – оцененная концентрация i -го определяемого элемента в пробе; $C_{СО}^i$ – аттестованное содержание определяемого i -го элемента в СО; $I_{пробы}^i$ – интенсивность аналитической линии i -го определяемого элемента в пробе; $I_{СО}^i$ – интенсивность аналитической линии i -го определяемого элемента в СО. В результате оценки получены грубые концентрации определяемых элементов (табл. 1).

Таблица 1
Сравнение аттестованных концентраций и результатов РФА, %

Элемент	$C_{ат}$	$C_{грубой\ оценки}$	$C_{точной\ оценки}$
Na	0,015	0,888	-0,037
Mg	49,590	2,090	42,196
Al	0,190	0,171	0,304
Si	40,470	32,331	38,541
P	0,002	0,006	0,003
K	0,001	0,016	0,078
Ca	0,170	0,184	0,132
Ti	0,005	14,040	4,723

⁶ <http://www.altlinux.ru/>

Далее программная система произвела выбор СО для расчета калибровочных коэффициентов по правилам из базы знаний. Кроме прочих, ис-

пользовалось правило выбора СО (трудноформализуемый прием) «по классификации»:

```
(defrule choose-ss-by-standard-defining-element " "
  (probe (name ?pname)) ; исследуемая проба
  (need-element (name ?el)) ; исследуемый элемент
  (rock-defining (element ?el)) ; элемент -
                                ; породообразующий
  (probe-concentration (name ?pname) (element ?el)
    (value ?aconc)) ; концентрации эл-та в пробе
  ?st <- (standard (name ?st-name)) ; выбрать СО
  (concentration (element ?el) (standard ?st-name)
    (value ?conc)) ; конц. эл-та в СО
  (range (element ?el) (min ?min) (max ?max))
    ; какой классификации (интервалу
    ; концентраций) принадлежит стандарт?
  (test (and (> ?aconc ?min) (< ?aconc ?max)))
    ; попадает ли концентрация эл-та в СО в
    ; этот интервал?
  (test (and (> ?conc ?min) (< ?conc ?max)))
    ; попадает ли концентрация эл-та в пробе в
    ; этот интервал?
  => ; Следовательно, использовать этот СО.
  (assert (use-standard (name ?st-name))))
```

Используя данные грубой оценки, а также прием выбора СО «по интервалу», осуществлен подбор следующего калибровочного массива проб: СГХМ-4, СГХ-3, СА-1, СГ-1А, DTS-1, СГХМ-3, СДО-3, СИ-3, СИ-2 (табл.2). SiO₂, CaO в качестве основных породообразующих элементов, были использованы для подбора СО для калибровки в

правиле «по интервалу». Качественно программой была выбрана смешанная, в основном карбонатная, калибровка для пробы ультраосновного состава (СО DTS-1): содержание SiO₂ в карбонатных и ультраосновных породах лежит в одном интервале концентраций.

Таблица 2

Аттестованные концентрации определяемых элементов в стандартных образцах, %

Элемент	СГД2	СГХМ4	СГХ3	СА1	СГ1А	СГХМ3	СДО3	СИ3	СИ2	DTS1
Na	2,72	1,65	1,57	2,31	5,46	0,63	1,86	1,38	0,46	0,015
Mg	6,81	0,49	1,62	2,22	0,05	11,7	3,44	12,89	5,97	49,59
Al	14,93	11,31	16,49	18,12	13,84	4,98	3,6	5,48	1,89	0,19
Si	46,63	70,54	60,54	60,6	73,36	25,07	11,9	19,81	12,35	40,47
P	1,03	0,27	0,19	0,19	0,013	1,82	0,23	0,06	0,03	0,002
S	0,015	0,44	0,03	0,087	0,013	0,05	0,19	0,02	0,02	0,0012
Cl	0,0155	0,02	-	-	-	0,04	1,7	-	-	0,0011
K	3,09	2,23	2,44	3,43	4,14	1,13	0,51	2,75	0,49	0,001
Ca	10,68	0,52	0,41	0,48	0,14	17,76	39,23	21,46	38,48	0,17
Ti	1,72	0,61	0,98	0,94	0,072	0,26	0,3	0,28	0,093	0,005
V	0,025	0,0058	0,018	0,016	0,0005	0,0075	0,0057	0,003	0,0023	0,0011
Cr	0,0058	0,0075	0,013	0,0096	0,0012	0,0029	0,0034	0,003	0,001	0,399
Mn	0,167	0,105	0,132	0,042	0,2	0,48	0,218	0,3	0,28	0,12
Fe	11,33	3,8	5,13	7,2	0,66	10,12	2,25	1,15	0,43	1,03
Co	0,004	0,0009	0,0029	0,0021	0,0001	0,0012	0,0012	0,0012	0,0002	0,0137
Ba	0,152	0,038	0,055	0,09	0,0019	0,034	0,01	0,04	0,005	0,0002

В процессе измерения калибровочного массива в качестве образца сравнения (ОС) применялся СО среднего состава СГД-2, использованный ранее для начальной оценки концентраций определяемых элементов. На следующем этапе проведено вычисление калибровочных коэффициентов по выбранным СО из уравнения

$$C_{\text{пробы}}^i = a_0^i + \sum_{j \in K(i) \cup \{i\}} a_j^i I_j,$$

где a_j^i – коэффициент влияния на интенсивность измеряемой аналитической линии i -го определяемого элемента аналитической линии j -го элемента; a_0^i – свободный член; $K(i)$ – функция, отображающая индекс элемента i на множество индексов элементов, интенсивности аналитических линий которых влияют на интенсивность аналитической линии i -го элемента. Функция $K(i)$ представлена в базе данных. Вычисление проведено без стадии выбраковки СО. В результате получена более точная оценка концентрации определяемых элементов (табл. 1). Исходя из полученных результатов, исследуемая проба относится к классу ультраосновных пород. Для увеличения точности анализа возможен повторный цикл подбора СО и вычисления калибровочных коэффициентов. Кроме того, фактором, влияющим на точность определения содержания элементов в пробе, но не учтенным в пилотном проекте, является уточнение калибровочного уравнения.

Оценка производительности разработанной программной системы показала, что наиболее медленные приемы анализа – это измерение интенсивностей аналитических линий. Затраченное на съемку время на два порядка больше, чем выполнение любой вычислительной процедуры или логического вывода какого-либо заключения.

Заключение

Разрабатывается *программная технология*, направленная на автоматизацию планирования методики анализа вещества в РФА и разработку программного обеспечения, выполняющего эту функцию. Авторами поставлена проблема создания «электронных вариантов» трудноформализуемых и неформализуемых приемов анализа, разработки сценариев (комбинации приемов анализа) для решения конкретных аналитических задач. Решения перечисленных задач осуществляются методами искусственного интеллекта.

Реализован пилотный проект – система количественного определения рентгенофлуоресцентным методом содержания порообразующих и следовых элементов в образце неизвестного состава. Несмотря на спорность принимаемых реализованной программой решений, проект показал принципиальную реализуемость разрабатываемой *программной технологии*. Данная *программная технология* позволяет сформировать направление решения ряда важных задач научно-прикладного характера в РФА:

- автоматизации трудноформализуемых приемов анализа;
- обработки неполной, неточной, противоречивой информации;
- обеспечения возможности учета максимального количества доступной информации;
- разработки интеллектуальных обучающих систем;
- автоматического контроля процесса анализа и действий аналитика;
- повышения производительности труда и снижения требований к квалификации аналитика.

Работа проводится при финансовой поддержке РФФИ, гранты 01-07-90411, 02-07-06013, 00-05-64142, 02-05-06413.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ревенко А.Г. Рентгенофлуоресцентное определение содержаний Zn, Rb, Sr, Nb и Pb в фосфоритах / А.Г.Ревенко, Е.В.Худогова, Т.Ю.Черкашина, С.В.Пантеева // Мат. III Всерос. и IV Сиб. конф. по РСА. Иркутск: ИЗК СО РАН, 1998. С.84.
2. Рентгенофлуоресцентное определение химического состава головок бедренных костей и оссификатов / А.Г.Ревенко, Л.В.Родионова, Г.П.Петрова, Е.В.Худогова, К.Ананд, Б.И.Китов, Т.Ю.Черкашина, С.В.Пантеева // Там же. С.85.
3. Черкашина Т.Ю. Разработка методики рентгенофлуоресцентного определения содержаний Nb, Rb, Sr, Y, Zr и Zn в фосфоритах / Т.Ю. Черкашина, Е.В. Худогова // Тез. докл. XV Уральской конф. по спектроскопии. Заречный. 2001. С.86–88.
4. Худогова Е.В. Опыт применения РФА при определении следовых элементов в фосфоритах / Е.В.Худогова, Т.Ю.Черкашина, А.Г. Ревенко // Аналитика и контроль. 2001. Т.5, № 4. С.409–416.
5. Ревенко А.Г. Рентгеноспектральный флуоресцентный анализ природных материалов. Новосибирск: ВО Наука. Сиб. издательская фирма, 1994. 264 с.
6. Рентгенофлуоресцентный анализ / В.П.Афонин, Н.И.Комяк, В.П.Николаев, Р.И.Плотников. Новосибирск: ВО Наука. Сиб. отд-ние, 1991. 173 с.
7. Бахтияров А.В. Рентгеноспектральный флуорес-

- центный анализ в геологии и геохимии. М.: Недра, 1985. 144 с.
8. Финкельштейн А.Л. Расчет интенсивностей рентгеновской флуоресценции / А.Л.Финкельштейн, В.П.Афонин // Методы рентгеновского анализа. Новосибирск, 1986. С.5–11.
9. Афонин В.П. Рентгенофлуоресцентный силикатный анализ / В.П.Афонин, Т.Н.Гуничева, А.Ф.Пискунова. Новосибирск: ВО Наука. Сиб.отд-ние, 1984. 226 с.
- 10.Борходоев В.Я. Рентгенофлуоресцентный анализ горных пород способом фундаментальных параметров. Магадан: СВКНИИ ДВО РАН, 1999. 279 с.
- 11.Смагунова А.Н. Примеры применения математической теории эксперимента в рентгенофлуоресцентном анализе / А.Н.Смагунова, В.А.Козлов. Иркутск: Изд-во ИГУ, 1990. 232 с.
- 12.Молчанова Е.И. Программная оболочка для проведения рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) на аналитическом комплексе CPM25/IBM / Е.И. Молчанова, А.Н. Смагунова, И.М. Прекина // Аналитика и контроль. 1999. №2. С. 38–44.
- 13.Глухов Ю.Б. Определение содержания анализируемого элемента в пробе как задача точечной оценки функции регрессии / Ю.Б.Глухов, Н.Н.Глущенко// Тез. докл. XIV Всесоюз. совещания по рентг. и электронной спектроскопии. Иркутск: Вост.-Сиб.правда, 1984. Кн.И. С.155.
14. Программное обеспечение рентгенофлуоресцентного спектрометра VRA-30, управляемого компьютером / Б.И.Китов, А.Г.Ревенко, Т.А.Ясныгина и др. // Аналитика и контроль. 1999. №3. С.16-20.
- 15.Компьютер обретает разум: Пер. с англ./ Под ред. В.Л. Стефанюка. М.: Мир, 1990. 300 с.
16. Интеллектуальное управление динамическими системами/С.Н.Васильев, А.К.Жерлов, Е.А.Федосов, Б.Е.Федунов. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000. 325 с.
- 17.Нейлор К. Система DENDRAL распознавания химических структур // Как построить свою экспертную систему. М.: Энергоатомиздат, 1991. 286 с.
- 18.Черкашин Е.А. Программная система КВАНТ/1 для автоматического доказательства теорем: Дис. ... канд. техн. наук. Иркутск: ИДСТУ СО РАН, 1999. 253 с.

* * * * *

A TECHNOLOGY OF IMPLEMENTATION OF INTELLIGENT SOFTWARE FOR AUTOMATED PLANNING OF X-RAY FLUORESCENCE ANALYSIS TECHNIQUE

E.A.Cherkashin, T.Yu.Cherkashina, E.V.Khudonogova

An approach to implementation of analytical software for automating procedures of analytical investigations, which are hard to formalize. These are, e.g., standard samples selection for the calibration, selection and/or constructing/specifying the calibration equation. An approach to automating the analysis technique planning aimed to a construction of a concrete analytical task solution. The software is implemented using nowadays methods of computer science, namely methods of artificial intelligence. Field of the X-ray fluorescence analysis is chosen as an application area.